



Eine erneute Standortbestimmung 18 Jahre nach dem Neujahrsvortrag von Professor Joachim Klein 2002 zum Thema Chemie ist Leben – (über)lebt die Chemie?

THOMAS SCHEPER

Institut für Technische Chemie, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover,
scheper@iftc.uni-hannover.de

„Prognosen sind schwierig, vor allem, wenn sie die Zukunft betreffen“. Jeder kennt dieses Zitat, jeder schreibt es einer anderen Persönlichkeit zu: Nostradamus, Mark Twain, Winston Churchill, Kurt Tucholsky, Niels Bohr und vielleicht sogar Joachim Klein. Denn in seiner Neujahrsansprache am 10. Januar 2002 hat er den Versuch unternommen, vier Themen der Chemie zu definieren, in denen in der Zukunft die größten Umwälzungen zu erwarten wären. Natürlich hat er in seinem Vortrag erst die Leistungen der Chemie im Bereich der Herstellung von Arzneimitteln, von Düngemitteln, Kunstfasern, Farben und der Bauchemie dargestellt. Die Chemie begleitet uns ja im täglichen Leben in vielfältiger Art und Weise. Während die Physik allgemein als Wissenschaftsdisziplin gesehen wird, die alle grundlegenden Naturphänomene neutral untersucht, wird die Biologie als beschreibende Wissenschaft der belebten Natur positiv bewertet und die Chemie als Naturwissenschaft, die sich mit der Stoffzusammensetzung und der -umwandlung beschäftigt, eher negativ betrachtet, da sie für viele unserer Umweltprobleme verantwortlich gemacht wird. Natürlich ist dies eine sehr vereinfachte Betrachtungsweise, doch haben Kommunikationswissenschaftler in den letzten Jahren detailliert erarbeitet, dass das Bild der Chemie trotz aller PR-Maßnahmen in den letzten 20 Jahren noch negativer geworden ist.

Erstaunlicherweise ist die chemische Industrie (es gibt keine physikalische und es gibt keine biologische Industrie!) in den letzten 18 Jahren dennoch weltweit rasant gewachsen. 2002 lag der weltweite Umsatz an Chemieprodukten bei 1,4 Billionen Euro, im Jahr 2019 bei 3,6 Billionen Euro. Deutschland ist einer der größten Exporteure von Chemie- und Pharmaprodukten und in den letzten 20 Jahren hat sich der Verbrauch von chemischen Produkten pro Person gerade im asiatischen Raum dem der westlichen Welt angenähert. Ein Leben ohne Chemie ist nicht möglich.

Lassen wir das Renommee der Chemie und speziell der chemischen Industrie in der Bevölkerung gerade der westlichen Welt einmal außer Acht und konzentrieren wir uns auf die Aussagen, die Herr Klein in seinem Vortrag in vier Punkten zusammengefasst hat. So postuliert er, dass die Chemie als eigenständige Naturwissenschaft sich in der Zukunft vier Themen intensiv widmen würde:

- I.) Der chemischen Bindung
- II.) Den Geheimnissen der Katalyse
- III.) Der nicht-kovalenten Wechselwirkung
- IV.) Der Chemie der Nachhaltigkeit.

Die chemische Bindung (I.) und die nicht-kovalenten Wechselwirkungen (II.) sind klassische Themengebiete der Grundlagenforschung in der chemischen Forschung. Hier hat sich in den letzten 20 Jahren die Chemie im Bereich der Quantenchemie sehr der Physik angenähert. Die von Herrn Klein beschriebenen Schwierigkeiten bestehen aber immer noch. Man ist weiter nicht in der Lage, größere komplexe Systeme besser zu beschreiben und vor allen Dingen Vorhersagen über die Stoffeigenschaften zu machen. Es hat sich wenig getan. Die großen Fragen bestehen immer noch.



Ich selbst möchte mich im weiteren zwei Gebieten widmen, die auch die wissenschaftlichen Arbeiten von Herrn Klein in seiner aktiven Laufbahn betreffen: der Katalyse und der Nachhaltigkeit bzw. Bioökonomie. Hier hat sich in den letzten 20 Jahren viel getan. Zwar wurden viele Erwartungen nicht erfüllt, andere wurden aber übertroffen und vor allen Dingen werden heute Wege beschritten, die vor 18 Jahren noch nicht vorhergesagt werden konnten.

Nachhaltigkeit und Bioökonomie

Unter nachhaltiger Chemie versteht man ein Wirtschaften in stofflichen Kreisläufen, die vollständig geschlossen sind. Rest- und Abfallstoffe müssen wieder zu Sekundärrohstoffen aufbereitet werden können, so dass es zu keiner weiteren Verknappung von Rohstoffen kommt. Besondere Hoffnung hat man zur Jahrtausendwende in nachwachsende Rohstoffe gelegt. Gerade im Bereich der Petrochemie ist das Erdöl als endliche Ressource anzusehen, die gerade bei einer wachsenden Weltbevölkerung schnell verbraucht sein würde. Hier greift die Bioökonomie an, die sich zum Ziel gesetzt hat, die erdölbasierte chemische Industrie in eine Industrie basierend auf pflanzlichen Rohstoffen umzuwandeln. Der Begriff der Bioökonomie (s. Abb.1) zeigt, dass die chemische Industrie sich hier die Biologie von der Rohstoffbasis bis zu den Prozessabläufen als Vorbild nehmen sollte.



Abb. 1. Definition Bioökonomie in Hinblick auf die Biologisierung der Chemischen Industrie

Erhebliche Anstrengungen wurden unternommen, um von der Petrochemie zu einer biobasierten Chemie zu gelangen. Aus der Sicht des Chemikers ist es egal, ob die Rohstoffe aus Erdöl oder aus pflanzlichen Quellen stammen. Die chemischen Synthesewege sind etabliert und bekannt, wenn die Rohstoffe klar definiert sind. In Abb. 2 sieht man, dass man über die Schlüsselsubstanz Essigsäure eigentlich die gesamten chemischen Industrieprozesse aufbauen kann. Dem Chemiker selbst ist es egal, ob die Essigsäure nun aus Erdöl oder aus nachwachsenden Rohstoffen wie Zucker gewonnen wird. Prinzipiell ließe sich also die chemische Industrie allein auf Rohstoffen wie der Glukose aufbauen.

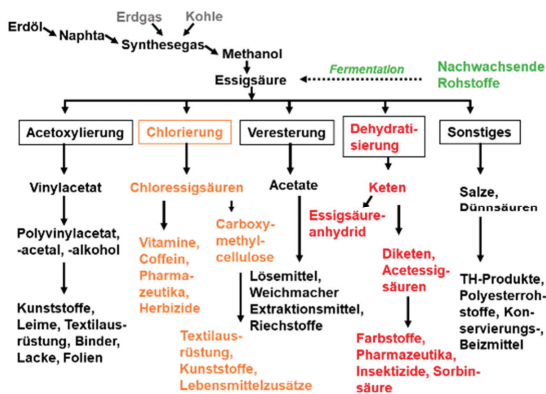


Abb. 2. Die Essigsäure als zentraler Baustein in der Chemischen Industrie

Lassen Sie uns das Ganze etwas anschaulicher gestalten, um die Möglichkeiten, aber auch die Probleme und Restriktionen deutlich zu machen. Ein Paradebeispiel hierfür ist die Aromenindustrie. Orangenöl wird in vielen Lebensmitteln von uns täglich gerne genossen. Die Hersteller des Orangenöls, das aus Orangenschalen gewonnen wird, verbessern das Orangenöl durch das Zuführen einer wichtigen Duftkomponente, dem Buttersäureethylester. Diese Substanz ist klassisch chemisch einfach und extrem kostengünstig herzustellen. Alle Ausgangsstoffe kann man petrochemisch gewinnen. Der so hergestellte Buttersäureethylester ist ein chemischer **naturidentischer** Aromastoff, der deklariert werden muss und dessen Akzeptanz beim Verbraucher äußerst gering ist. Verwendet man in dem Prozess nun aber natürliche Buttersäure und natürliches Ethanol und setzt für die katalytische Reaktion Biokatalysatoren, also Enzyme ein, dann erhalte ich den gleichen Buttersäureethylester nach dem gleichen Reaktionsschema und habe einen **natürlichen** Aromastoff, der vom Verbraucher ohne Probleme akzeptiert wird. Aus der Sicht des Chemikers handelt es sich um die gleiche Reaktion. Der Katalysator, den ich verwende, und die Rohstoffe kommen allein aus der Natur. Der Chemiker weiß, wie er sie verwenden muss, um die gewünschten Produkte herzustellen.

Gleiches gilt für die Herstellung von natürlichem Vanillin. Hier sei bemerkt, dass Vanillin der wichtigste Aromastoff weltweit ist und wir über 15.000 Tonnen natürliches Vanillin pro Jahr verwenden (Abb. 3). Dieses Vanillin kann aber gar nicht alleine aus der Vanilleschote gewonnen werden. Dieser Rohstoff ist extrem knapp, teuer und nur wenig verfügbar. Die rein chemische Synthese des Vanillins ist einfach, kostengünstig, aber als chemischer Aromastoff in der Lebensmittelindustrie verpönt. Unproblematisch kann ich das Vanillin in einem ähnlichen enzymtechnischen Prozess aus Ferulasäure, die man aus Reiskleie gewinnt, oder Eugenol, das ich aus Gewürznelken gewinnen kann, herstellen. Das Vanillin, das hier aus biologischen Komponenten gewonnen wird, ist natürlich und kann so als natürlicher Aromastoff deklariert werden. Dieses Vanillin hat einen sehr hohen Marktwert. Chemisch gesehen ist es identisch mit dem chemisch synthetisierten Vanillin. Der Verbraucher akzeptiert es ohne Probleme. Die Wertschöpfung ist hoch. In enger Kooperation mit Molekularbiologen sind nun die Chemiker dabei, Mikroorganismen maßgeschneidert zu gestalten, um aus biologisch einfachen nachwachsenden Rohstoffen wie der Glukose über chemische Reaktionswege, die in Mikroorganismen eingeschleust werden, solche Aromakomponenten herzustellen.

Ein Paradebeispiel ist hier das α -Jonon, das in roten Früchten, aber auch Veilchen vorkommt und einer der teuersten Aroma- und Duftstoffe in der Lebensmittelindustrie, aber auch der Parfümerie ist.

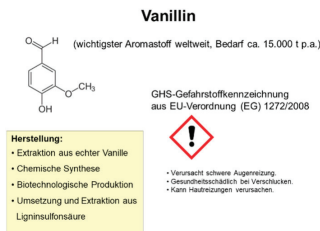


Abb. 3. Herstellung von Vanillin auf unterschiedlichen Wegen und
 Gefahrstoffkennzeichnung bei Nutzung in technischen Produkten

Bei diesen Beschreibungen ergibt sich schon das Problem, ob es sich eigentlich noch um Chemie oder Molekularbiologie oder Biologie oder Biochemie handelt. Aus der Sicht des Chemikers verwendet man Reaktionssysteme und Reaktionskomponenten aus der Natur und verwendet sie für chemische Synthesewege, um gewünschte Substanzen herzustellen, die definierte Eigenschaften haben. Hier ergeben sich aber interessante Probleme. Natürlich ist eine Deklaration auf Lebensmitteln nötig, ob es sich um einen chemischen naturidentischen oder einen natürlichen Aromastoff handelt. Der Hersteller muss aber nicht erwähnen, wie das natürliche Vanillin hergestellt wird. Ob es sich hier um eine Verbrauchertäuschung handelt, ist ein interessantes Diskussionsthema, das hier aber nicht weiter vertieft werden soll. Aber wenn ich das Vanillin, egal ob es chemisch synthetisiert ist, aus der Vanilleschote kommt oder über biologische Verfahren hergestellt ist als technisches Produkt verwende, muss ich jeweils der Gefahrstoffverordnung Rechnung tragen. So muss in einem technischen Produkt, in dem ich das Vanillin verwende (beispielsweise Reinigungsmittel) deklariert werden, dass das Vanillin gesundheitsschädlich beim Verschlucken ist, allergische Hautreaktionen verursachen kann und sogar genetische Defekte verursacht. Die entsprechenden Gefahrstoffsymbole müssen aufgebracht werden. Eine solche Deklaration ist nicht nötig, wenn wir die Substanzen aber in den Lebensmitteln verwenden. Beim Vanillin selbst, das nur in geringsten Konzentrationen in Lebensmitteln verwendet wird, mag dieser Unterschied in der Deklaration noch einleuchten. Es gibt aber andere Aromastoffe (Limonen), bei denen diese Unterschiede in der Deklaration schon als problematisch zu betrachten sind (Abb. 4). Diese aus Orangenschalen gewonnene Substanz kann Lebensmitteln zugesetzt werden oder als reines Lösungsmittel verwendet werden. Wieder sind die Gefahrstoffsymbole nur beim technischen Einsatz vorgeschrieben.

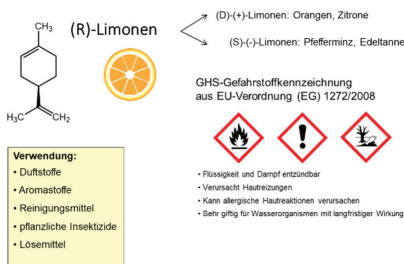


Abb. 4. Verwendung von aus natürlichen Quellen gewonnenen Limonens und
 Gefahrstoffkennzeichnung bei Nutzung in technischen Produkten



Aromastoffe sind nicht als Bulkchemikalien oder Bulkprodukte zu betrachten, da sie nicht im großem Tonnenmaßstab hergestellt werden. Hierzu gehören eher Produkte wie Kautschuk, das für die Reifenproduktion wichtig ist. Man hat festgestellt, dass er aus russischem Löwenzahn gewonnen werden kann. Die Eigenschaften solcher Reifen entsprechen dem herkömmlicher Reifen und Firmen wie Continental bemühten sich intensiv diese einfachen Pflanzensysteme verstärkt zu nutzen. Schnell musste man aber feststellen, dass hier die landwirtschaftlichen Flächen zum Anbau des Löwenzahns nicht ausreichen. Das Problem soll am Beispiel der Herstellung von Polyethylen deutlich gemacht werden (Abb. 5). Polyethylen ist ein Kunststoff, von dem 2017 weltweit 350 Millionen Tonnen produziert wurden. Der Kunststoff wird in Folien, Plastikflaschen und anderen Gegenständen des täglichen Bedarfs verarbeitet. Die Herstellung erfolgt über Ethanol, das auch aus Glukose oder Zellulose gewonnen werden kann. Diese pflanzlichen Rohstoffe lassen sich beispielsweise im Pappelkurzumtrieb herstellen. Hier werden schnellwachsende Pappeln verwendet und es ist belegt, dass pro Quadratmeter auch in unseren Breiten ca. 1 kg Pappelholz pro Jahr gewonnen werden kann. Wenn man vereinfacht annimmt, dass Erdöl den gleichen Kohlenstoffgehalt wie Pappelholz hat, lässt sich ausrechnen, wieviel Pappelholz benötigt wird, um die genannte Menge Polyethylen aus Holz zu gewinnen. Man kann ein halbes Kilogramm Polyethylen aus einem Kilogramm Erdöl herstellen, d.h. man benötigt 7×10^{10} kg Holz, um die Jahresproduktionsmenge aus dem Jahr 2017 bereitzustellen. Dies würde einer Agrarfläche von 7×10^5 km² entsprechen (s. Abb. 5). Dies entspricht in etwa der doppelten Fläche Deutschlands.



Abb. 5. Berechnung der Herstellung des weltweit benötigten Polyethylens aus natürlich nachwachsenden Rohstoffen

Das zeigt, dass gewaltige Rohstoffmengen benötigt werden, um unsere beliebten chemischen Produkte des täglichen Bedarfs herzustellen. Prinzipiell ist die Herstellung aus pflanzlichen Rohstoffen möglich, doch ergeben sich erhebliche Anbauflächenprobleme, um tatsächlich diese Mengen bereitzustellen. Die nachhaltige chemische Industrie kann deshalb nicht einfach von Erdöl auf pflanzliche Rohstoffe umschalten, da die Anbauflächen begrenzt sind und eigentlich zur Nahrungsmittelproduktion benötigt werden. Darüber hinaus ergibt sich das Problem, dass das Polyethylen zwar aus nachwachsenden Rohstoffen gewonnen wird, es aber immer noch umweltproblematisch ist, da das Polyethylen, das aus natürlichen Rohstoffen gewonnen ist, identisch mit dem Polyethylen aus Erdöl ist und nicht bioabbaubar ist. Die Umweltbelastung bleibt also ähnlich groß.



In den letzten 20 Jahren hat sich gezeigt, dass zwar viele Produkte aus nachwachsenden Rohstoffen gewonnen werden können, diese dadurch aber nicht unbedingt umweltverträglicher werden bzw. die Rohstoffmenge für die Produktion der gewünschten Tonnagen völlig unzureichend ist. Andererseits werden in der Aroma- und Duftstoffindustrie nicht mehr wertvolle nur begrenzt verfügbare Pflanzen ausgebeutet und so die Biodiversität erhalten. Es muss bedacht werden, dass nur etwa 5 bis 7 % des jährlichen Erdölverbrauchs in die stoffliche Nutzung geht, d.h. von der gesamten Menge des Erdöls, das wir weltweit im Jahr verbrauchen, werden nur 5 bis 7 % benötigt, um Kunststoffe, Düngemittel oder Farben und Pharmaka herzustellen. Die restliche Menge wird für die Energiegewinnung und für die Mobilität verwendet. Hier hat deshalb ein Umdenken eingesetzt, dass zum einen die Kunststoffprodukte sortenrein in Alltagsprodukte umgewandelt werden, um sie nach der Benutzung ohne Probleme wieder verwenden zu können (Umwandlung in Sekundärrohstoffe) und dass vor allem die Chemie neue Kunststoffsysteme entwickeln muss, die biologisch unproblematisch abgebaut werden können. Hier sind die Chemiker mit ihrem Stoff- und Reaktionswissen gefordert, neuartige Materialien bereitzustellen, die für die Nutzung als Gebrauchsgegenstand optimal sind, aber nach der Nutzung ohne Probleme in die Grundsubstanzen umgewandelt werden können. Für die Synthesewege können biologische Systeme oder Wissen über biologische Abbauewege hilfreich sein. Die Ausgangsstoffe selbst können aber durchaus aus der Petrochemie gewonnen werden.

Insgesamt hat es also in der chemischen Industrie ein Umdenken in Bezug auf die Nachhaltigkeit gegeben. Die Bioökonomie ist hilfreich, um natürliche Rohstoffe dort einzusetzen, wo es sinnvoll ist (Aromaproduktion, Lebensmittelzusatzstoffe, Pharmaka). Aber letztendlich kann mit dem Wissen über biologische Synthese und Abbauewege die Chemie neue Materialien schaffen, die hochwertig sind, aber ohne Probleme in eine Kreislaufwirtschaft zurückgeführt werden können. Die Entwicklungen in diesen Gebieten sind rasant und werden die chemische Industrie und die Ausbildung unserer Naturwissenschaftler an den Universitäten in den nächsten Jahren massiv herausfordern.

Katalyse

Die Katalyse war schon immer ein Kernthema der Chemie. Das Verständnis, aber auch das Nutzen solcher Prozesse, die ohne Komplikationen schnell und effizient Ausgangssubstanzen in gewünschte Produkte umwandeln, sind für den Erfolg der chemischen Industrie immer ausschlaggebend gewesen. Hier hat Herr Klein in seinem Vortrag vermutet, dass das Verständnis für diese Reaktionen intensiviert werden würde, um damit die Planbarkeit chemischer Reaktionen besser in den Griff zu bekommen. Das Verständnis der katalytischen Abläufe ist sicherlich Gegenstand vieler Disziplinen der Chemie von der physikalischen Chemie hin bis zur makromolekularen Chemie. Aber genauso wenig wie 2002 vorausgesagt werden konnte, dass 2008 mit der Einführung des iPhone die sogenannten Smartphones ihren Siegeszug beginnen würden, konnte vorausgesagt werden, dass die Auslegung chemischer Prozesse und Reaktionen heute immer stärker durch Digitalisierungssysteme vorangetrieben wird. Ähnlich wie Übersetzungsprogramme eigentlich völlig ohne linguistisches Verständnis arbeiten, sondern rein auf statistischen Auswertungen beruhen, nutzen auch heute Künstliche Intelligenz und Machine Learning-Programme Informationen in unvorstellbaren Geschwindigkeiten, um mögliche Reaktions- und Synthesewege aufzustellen. Diese disruptiven Technologien sollen in ihrer Wirkung in der chemischen und biotechnologischen Industrie im Folgenden kurz angerissen werden. In Abb. 6 ist dargestellt, wie sich ein katalytischer Syntheseprozess aufbauen lässt. Zuerst wird der Katalysator erprobt. In dem Schema werden drei verschiedene Katalysatortypen verwendet. Hiervon können dann verschiedene Varianten (Zusammensetzung) des Katalysators



verwendet werden (in dem Schema 10). Dann kann die Struktur oder die Fixierung des Katalysators (hier in 20 Variationen) modifiziert werden. Beim Prozess selber können die Reaktortypen (hier zwei) erprobt werden und die Prozessbedingungen (hier fünf wie Temperatur, Druck, Licht, Strömungsgeschwindigkeit und Mischverhalten) sowie die Zusammensetzung der Reaktionsmischung der Ausgangsprodukte variiert werden (30 Reaktionsgemische). Letztendlich muss dann das Produkt isoliert werden (Aufarbeitung mit acht Varianten). Damit ergeben sich allein für die Wahl des Katalysators 600 Möglichkeiten, für die Wahl der Prozessbedingungen 2.400 Möglichkeiten, also insgesamt 1,44 Millionen von Kombinationen, die durchgetestet werden müssten. Lange Zeit hat man versucht, durch das molekulare Verständnis der Katalyse und der Reaktionsbedingungen die optimalen Kombinationen zu ermitteln. Das ist jedoch extrem aufwendig, zeitraubend und sicherlich für die Grundlagenforschung hochinteressant, jedoch für die schnelle Etablierung von Prozessen zur Produktion von hochwertigen Produkten ineffizient.

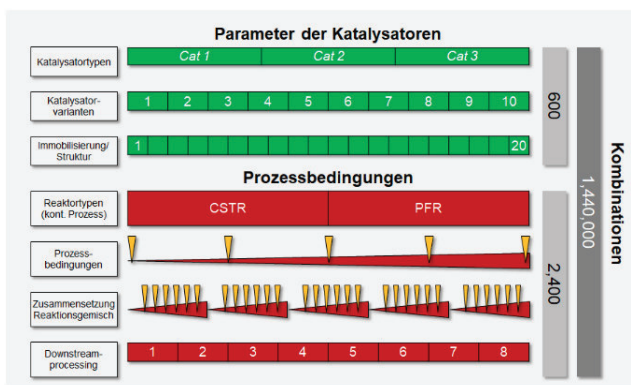


Abb. 6. Kombinationsmöglichkeiten bei der Etablierung eines katalytischen Produktionsprozesses

Mit Hilfe moderner Digitalisierungstools können diese Kombinationen sehr schnell durchgespielt werden. Das wird in Abb.7 dargestellt. Dazu wird der Prozess zur Herstellung eines Produktes in sechs Module unterteilt und jedes dieser Module (beispielsweise Katalysatorauswahl) besteht aus Untermodulen. In den Untermodulen wird dann beispielsweise der Katalysatortyp ausgewählt und verschiedene Varianten erprobt. Jedes dieser Hauptmodule kann beispielsweise aus vier bis fünf Untermodulen bestehen. Werden pro Hauptmodul sechs Untermodule verwendet, ist man schnell in der Größenordnung von 360 Millionen Kombinationsmöglichkeiten. Kein Prozessmodell kann hier den optimalen Prozess ermitteln. Es ist jedoch möglich, diese Module in virtuellen Prozessräumen über sogenannte digitale Zwillinge als Modell zu spiegeln. Das heißt, der reale Prozess der Katalysator- oder der Reaktorauswahl wird als digitaler Zwilling, als Algorithmus in der virtuellen Prozessarchitektur dargestellt. In diesem virtuellen Rechneraum können die digitalen Zwillinge ohne Probleme miteinander kommunizieren und in kürzester Zeit verschiedene Varianten austesten und unter den gegebenen Bedingungen (Eduktwahl, Produktwahl, ökonomische Randbedingungen etc.) einen optimalen Syntheseprozess vorschlagen.

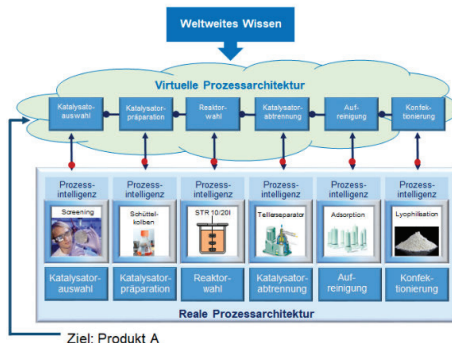


Abb. 7. Spiegelung eines realen Produktionsprozesses in eine virtuelle Prozessarchitektur

Vorteilhaft ist ein solches System, da der virtuelle Raum mit dem weltweiten Wissen ständig über das Internet im Austausch steht. Das heißt: Jederzeit kann das neueste Wissen, egal ob es detailliertes Grundlagenwissen, Stoff- oder nur Erfahrungswissen ist, eingebracht werden und zu einer weiteren Optimierung des Gesamtprozesses führen. Letztendlich macht ein solches digitale System einen Vorschlag, wie aus bestimmten Ausgangsstoffen ein bestimmtes Produkt mit definierten Eigenschaften hergestellt werden könnte. Ein solcher Prozess, der in der virtuellen Prozessarchitektur beschrieben wird, kann dann, wie in Abb. 8 zu sehen, in die reale Prozessarchitektur gespiegelt werden. Hier wird der Prozess mit sieben definierten Modulen dargestellt – entsprechend der Auslegung im virtuellen Raum. In dem realen Prozess kann dann der chemische Prozess ablaufen und gleichzeitig über die virtuelle Prozessarchitektur auf Schwankungen hin überprüft und weiter optimiert werden. Auch hier ist die Verbindung mit dem weltweiten Wissen in der Lage, den Prozess stets unter optimalen Bedingungen laufen zu lassen.

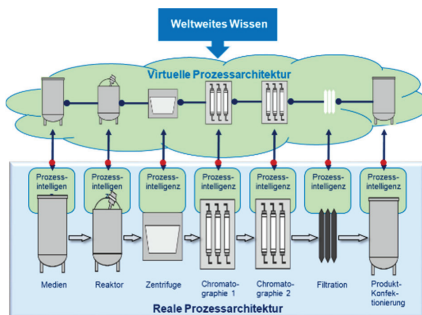


Abbildung 8 Interaktion zwischen der virtuellen und der realen Prozessarchitektur

Dieses disruptive Prozessverständnis hat in der chemischen Industrie schon durchaus Eingang gefunden. In der biotechnologischen Industrie, also bei der Verwendung von biologischen Systemen zur Produktion von Pharmaka und anderen Substanzen wird das System bisher erprobt.



Natürlich ergeben sich heute noch viele Schwierigkeiten beispielsweise bei der rechtlichen Beurteilung eines solchen Prozesses und der Patentierbarkeit der Systeme. Dennoch zeigt sich, ähnlich wie beim Umdenken jedes einzelnen über den Smartphone-Gebrauch auch, dass mit Digitalisierungstechnik große Mengen schnellstmöglich effizient verarbeitet werden können, ohne dass detailliertes Wissen benötigt wird. Die Kombination alleine von vielen Informationshäppchen ermöglicht es, stabile und effiziente Prozesse bereitzustellen.

Vor wenigen Wochen wurde in *Science* die Künstliche Intelligenzsoftware SYNTHIA vorgestellt, die für verschiedene potentielle COVID-19-Pharmaka neue Syntheserouten ermitteln sollte. Bedingt durch die Knappheit vieler Pharmawirkstoffvorstufen auf dem Markt sollten diese Substanzen (einschließlich Remdesivir, Dexamethason) über neue Synthesewege aus anderen Rohstoffen bereitgestellt werden. Die KI-Software sollte für 12 Pharmakomponenten neue Synthesewege für die Produktion im Kilogrammmaßstab finden. Tatsächlich wurden für 11 der Komponenten neue Synthesewege gefunden. Allein für die antivirale Substanz Umidifenovir wurden vier neue nicht patentierte Synthesewege gefunden. Leider wurden bisher nicht für das vielversprechende Remdesivir neue Synthesewege bereitgestellt. Dennoch zeigt dieses Beispiel, dass hier im Bereich der Katalyse und der chemischen Synthese völlig neue Wege innerhalb der letzten 20 Jahre eröffnet wurden.

Schlussbetrachtung

Vor 18 Jahren hat Herr Klein in seinem Neujahrsvortrag gewagt, einen Blick in die Zukunft der Chemie zu werfen. Die von ihm definierten Themengebiete waren interessant und sind es immer noch. In zwei dieser Gebiete ist der weitere Erkenntnisgewinn bisher eher gering und nicht unbedingt revolutionär, aber in den anderen beiden Gebieten hat sich in den letzten Jahren sehr viel getan. Zum Teil entsprechen die Entwicklungen bei der Nachhaltigkeit durchaus den Vorstellungen und Prognosen von Herrn Klein. Im Bereich der Katalyse sind aber völlig neue Wege aufgetan worden, an die man vor 18 Jahren überhaupt noch nicht denken konnte. Nicht allein die Erweiterung des Grundlagenwissens hat hier zum Erfolg geführt, sondern das geschickte Kombinieren von Informationen und das Aufstellen von intelligenten Algorithmen, die helfen, das vorhandene Wissen jeglicher Art zielführend, schnell und effizient zu nutzen.

Die Digitalisierung steckt in der Chemie noch in den Kinderschuhen. Die Möglichkeiten und Potenziale sind noch nicht einmal annähernd bekannt. Wir sollten aber den Mut haben, mit viel Neugier und Wissensdurst die Möglichkeiten, die sich hier ergeben, zu nutzen und nicht nur allein die Chemie, sondern gerade die Grenzgebiete zwischen Chemie und anderen Naturwissenschaften voranzutreiben. Die klassische Chemie existiert für mich nicht mehr. Die harten Grenzen zwischen Chemie, Physik und Biologie verschmelzen immer mehr. Die Chemie braucht physikalische Erkenntnisse gerade im Bereich der Quantenphysik unbedingt, um Grundlagenwissen zu generieren. Die Chemie hat solche Auswirkungen auf biologische Systeme in jeglicher Art, dass auch hier nur Fortschritte erzielbar sind, wenn wir über die Grenzen hinweg denken. So ergeben sich enorme Herausforderungen an die Ausbildung in den Naturwissenschaften an Schulen und Universitäten - gerade im Bereich der Digitalisierung. Diese auch breite Weiterbildung ist schwierig, da oft, wenn die Diskussion auf chemische Fragestellungen kommt, Gesprächspartner abblocken mit dem Argument „schon in der Schule das Fach Chemie gehasst und nicht verstanden zu haben.“ Gepaart mit den Ressentiments, die gegenüber der Chemie aufgrund der vielseitigen Umweltbelastungen bestehen wagen selbst Chemiker häufig nicht mehr, ihr Fach offensiv zu vertreten und darzustellen. Aber auch hier hat in den letzten Jahren drei, vier Jahren ein gewaltiger Sinneswandel eingesetzt. Frau Mai Thi Nguyen-



Kim hat als Chemikerin das Internet erobert. In ihrem You-tube-Kanal „The secret life of scientist“ oder „schön schlau“ hat sie gezeigt, wie man die Chemie einem breiten Publikum nahebringen kann. Ihre Lernvideos „musstewissen“ sind bei jungen Menschen „Kult“. Und wer ihr Anfang 2020 veröffentlichtes Video zur Corona-Pandemie gesehen hat, versteht, dass man die Chemie einem breiten Publikum mit all seinen Faszinationen nahebringen kann. Diese Wege der Weiterbildung und Ausbildung müssen wir in den nächsten Jahren weiter in Angriff nehmen.